

СКІЛЬКИ ДНК-ПОДІБНИХ КОНФОРМЕРІВ МАЄ МОЛЕКУЛА 2'-ДЕЗОКСИЦИТИДИЛОВОЇ КИСЛОТИ ?

Кукліна Ю. І.¹, Ніколаєнко Т. Ю.², Говорун Д. М.^{3,4}

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

² Київський національний університет імені Тараса Шевченка

³ Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

⁴ Інститут високих технологій Київського національного
університету імені Тараса Шевченка

julia_dp547@ukr.net

За допомогою квантово-механічного методу функціоналу густини проведено повний конформаційний аналіз [1] молекули 2'-дезоксидитидилової кислоти – структурної ланки ДНК. Серед одержаних 613 стійких конформерів цієї молекули виявлено 16 (див. Рис. 1), у яких значення усіх (окрім ζ) номенклатурних торсійних кутів [2] подібні до тих, що реалізуються в ДНК у А, В чи Z-формах.

Їхні структурні параметри наведено в Табл. 1 (див. також рис. 1).

Табл. 1. Структурні параметри ДНК-подібних конформерів молекули
2'-дезоксидитидилової кислоти

№	Торсійні кути, град							ΔG, ккал/моль
	α	β	γ	ε	ζ	χ	Р	
BI-ДНК								
1	-56,7	163,4	58,5	170,1	145,7	-172,7	189,8	5,51
2	-75,7	161,8	51,5	168,6	156,4	-161,3	161,7	5,95
3	-45,8	-172,4	56,2	171,9	-106,1	-144,9	153,6	6,42
4	-48,3	-175,0	55,2	170,3	-106,9	-156,1	155,4	6,49
5	-63,8	153,4	45,3	170,0	-78,4	-176,5	187,5	6,78
6	-58,2	158,9	50,9	168,5	179,5	-159,2	160,0	7,06
AI-ДНК								
7	-71,2	-173,0	56,6	-171,2	157,1	-165,8	13,9	6,60
8	-44,4	177,2	58,6	-171,1	-104,2	-163,8	14,4	6,62
9	-51,6	-177,2	56,5	-175,1	-175,8	-165,0	14,0	6,74
10	-63,3	157,8	50,6	-168,1	147,7	-179,0	351,8	6,87
11	-67,5	-170,1	59,7	-169,0	-59,1	-163,9	15,8	7,83
AII-ДНК								
12	176,4	-158,3	-177,5	-176,4	103,8	-172,1	10,0	9,07
ZI-ДНК								
13	-147,6	-123,5	55,8	-67,9	97,6	-137,4	157,6	8,57
ZII-ДНК								
14	176,8	164,9	51,0	-68,3	-102,2	-158,1	163,8	7,32
15	163,8	168,8	50,0	-69,1	-91,6	-177,2	199,9	7,43
16	178,6	136,8	48,0	-67,5	-45,0	-160,3	159,5	7,49

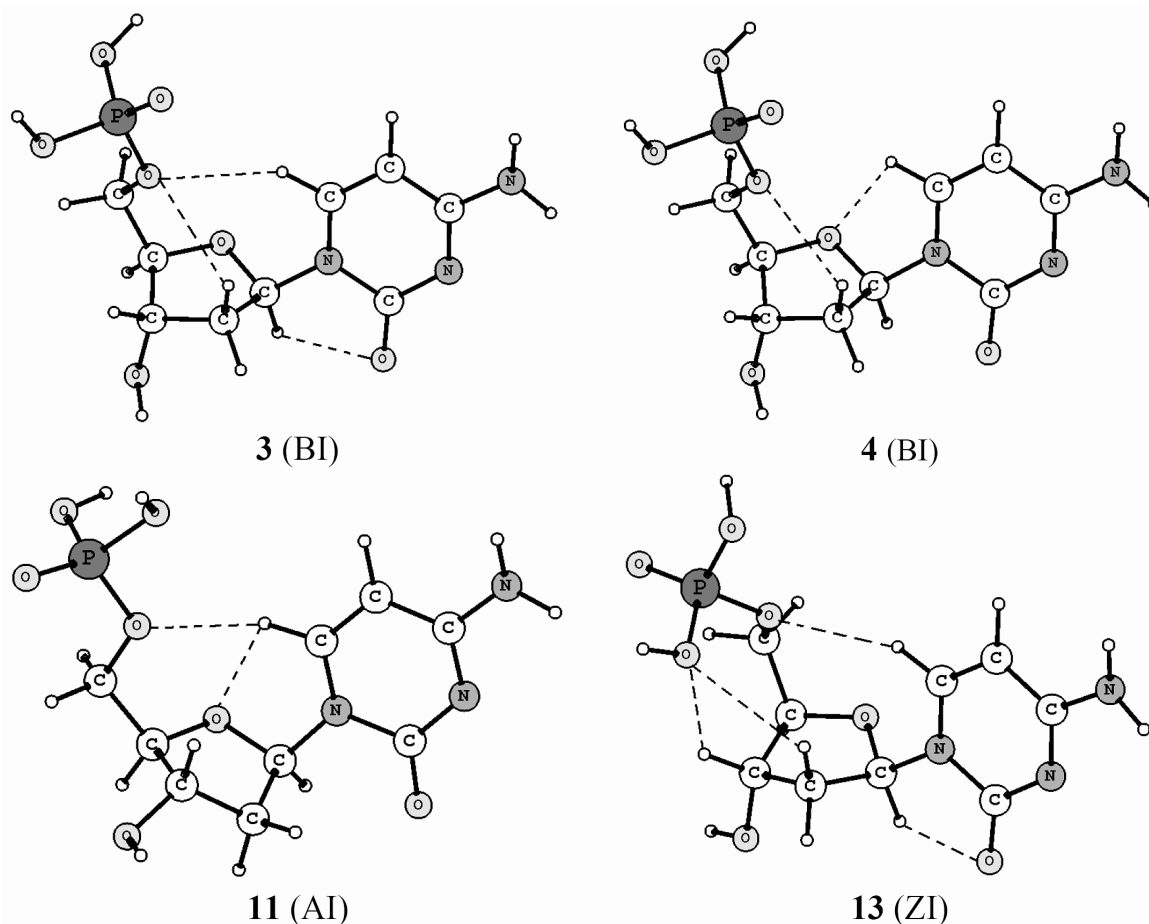


Рис. 1. Структури вибраних ДНК-подібних конформерів молекули 2'-дезокситидилової кислоти

Серед виявлених конформерів лише у 4 (*BI*: №№ 3, 4; *AI*: № 11; *ZI*: № 13) значення кута ζ (який визначає орієнтацію однієї із гідроксильних груп у фосфатній групі молекули) також є ДНК-подібним.

За допомогою методу QTAІМ [3] аналізу топології просторового розподілу густини електронного заряду досліджено внутрішньомолекулярні водневі (на рис. 1 показано пунктиром) зв'язки в усіх ДНК-подібних конформерах.

Визначним фактом є те, що конформація нуклеотиду в складі ДНК відповідає одному із численних локальних мінімумів на його поверхні потенціальної енергії. Виявлення в [1] «глобального» мінімуму дозволило з'ясувати, що ДНК-подібні конформації лежать вище від нього на $(6,4 \div 8,6)$ ккал/моль.

[1] Булавін Л.А., Ніколаєнко Т.Ю., Говорун Д.М. Квантово-механічний конформаційний аналіз молекули 2'-дезокситидилової кислоти – структурної ланки ДНК // Доповіді Національної академії наук України. – 2010. – друкується

[2] Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – Москва: Мир, 1966. – 668 с.

[3] Бэйдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. –М.: Мир, 2001. –532 с.